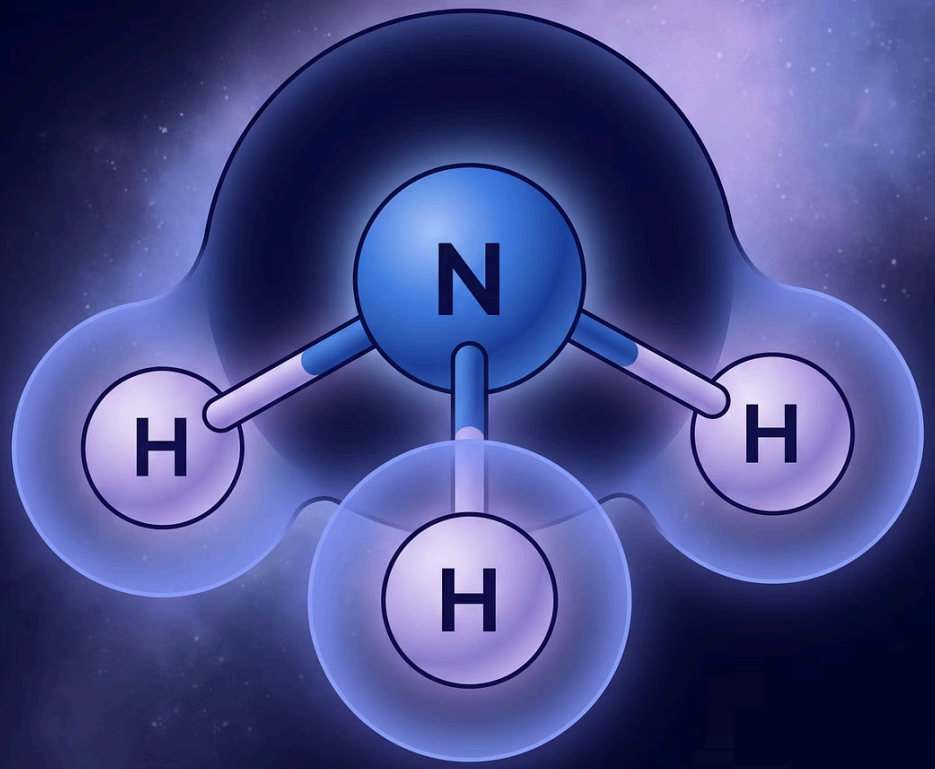
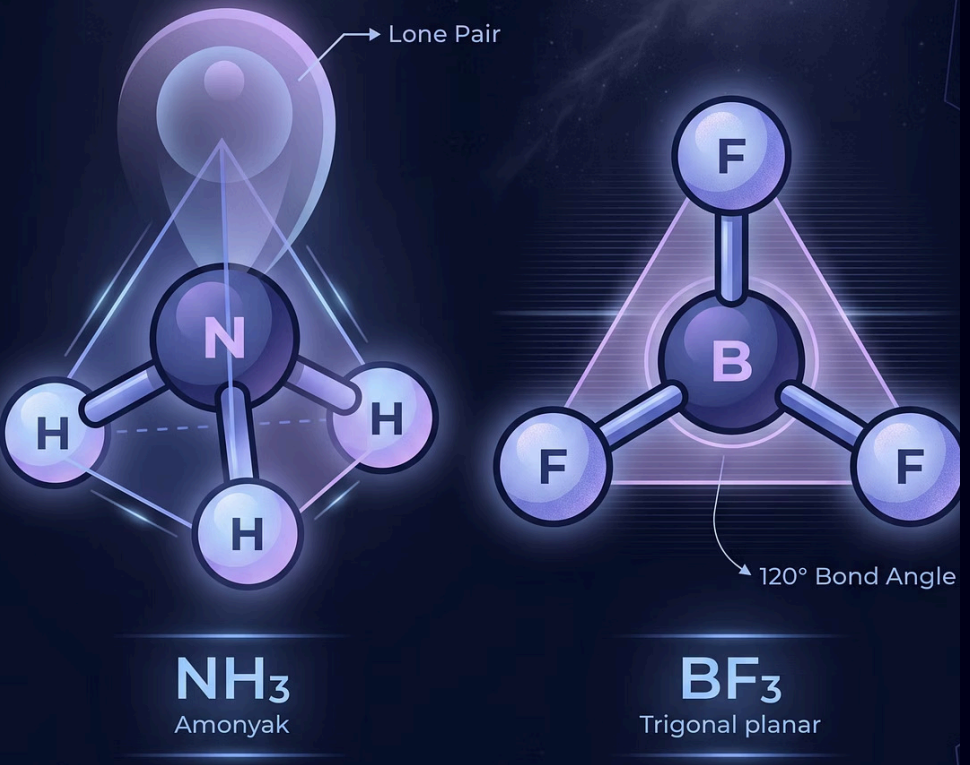


Moleküler Geometri ve Tasarımın Dili

XH3 Moleküllerinde Gizli Hikmet

Ders Sunumu — *Teradigma*



Aynı Formül, Farklı Şekiller

NH3 ve BF3 — ikisi de XH3 formülünde, ikisi de üç bağ içeriyor.

NH3

Üçgen piramit geometrisi

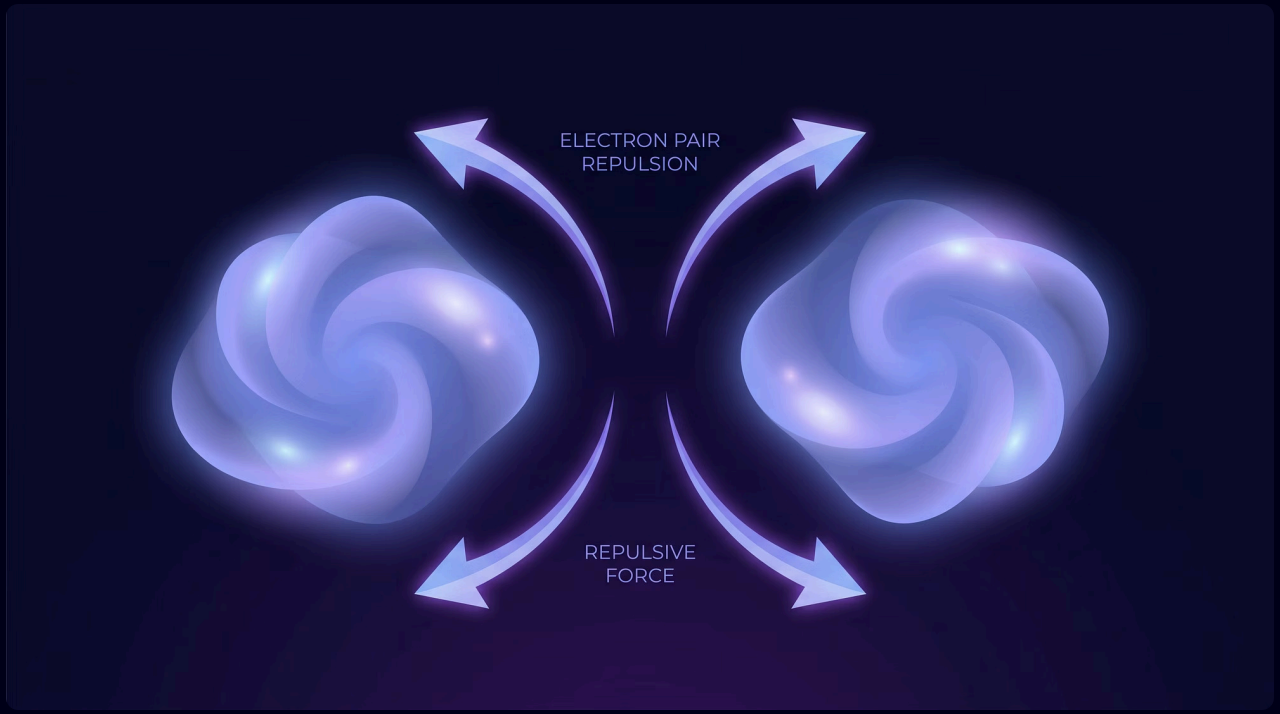
BF3

Düzlem üçgen geometrisi

Bu farklılık tesadüfi değil; elektronların uzaydaki hassas düzenlemesinin ve matematiksel yasaların bir sonucu.

> Kör atomlar, geometri bilmeden nasıl mükemmel açılarla düzenleniyor?

VSEPR: Geometrinin Kuralı



Elektron çiftleri, birbirlerinden **en uzak mesafeye** yerleşecek şekilde düzenlenmiştir — bu düzenlemeyi VSEPR teorisi tanımlar.

İtme Etkisi

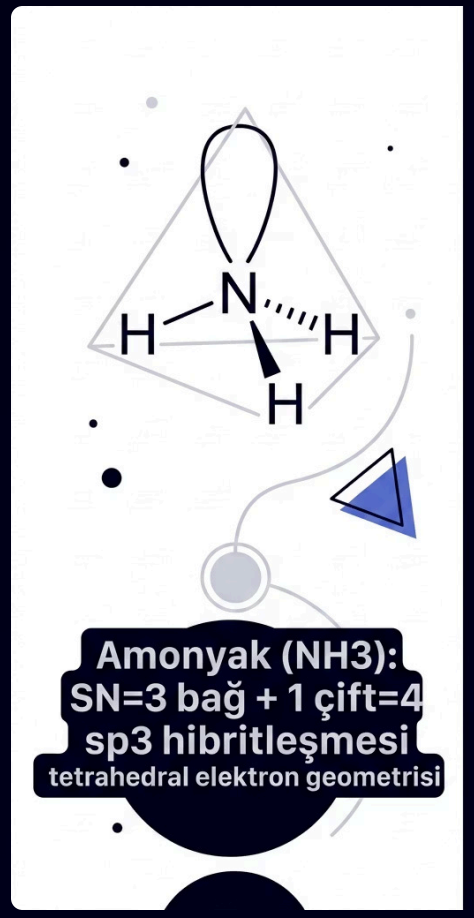
Elektron çiftleri arasındaki itme etkisi, moleküle özgü geometriyi oluşturur.

Moleküler Geometri

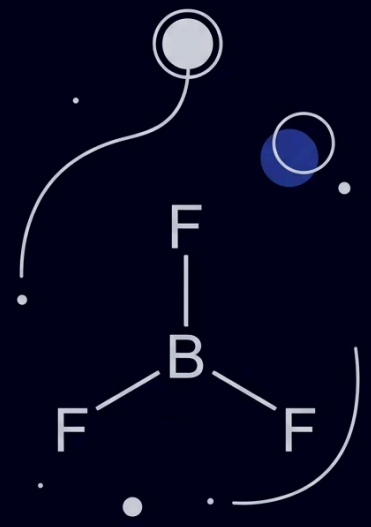
Sadece atomların konumları moleküler geometriyi belirler; yalnız çiftler geometriye dahil edilmez.

Sterik Sayı: Geometrinin Anahtarı

Sterik Sayı (SN) = bağ çifti sayısı + yalnız çift sayısı



Bor Triflüorid (BF3):
SN=3 bağ + 0 çift=3
sp2 hibritleşmesi
trigonal düzlemsel geometri



NH3

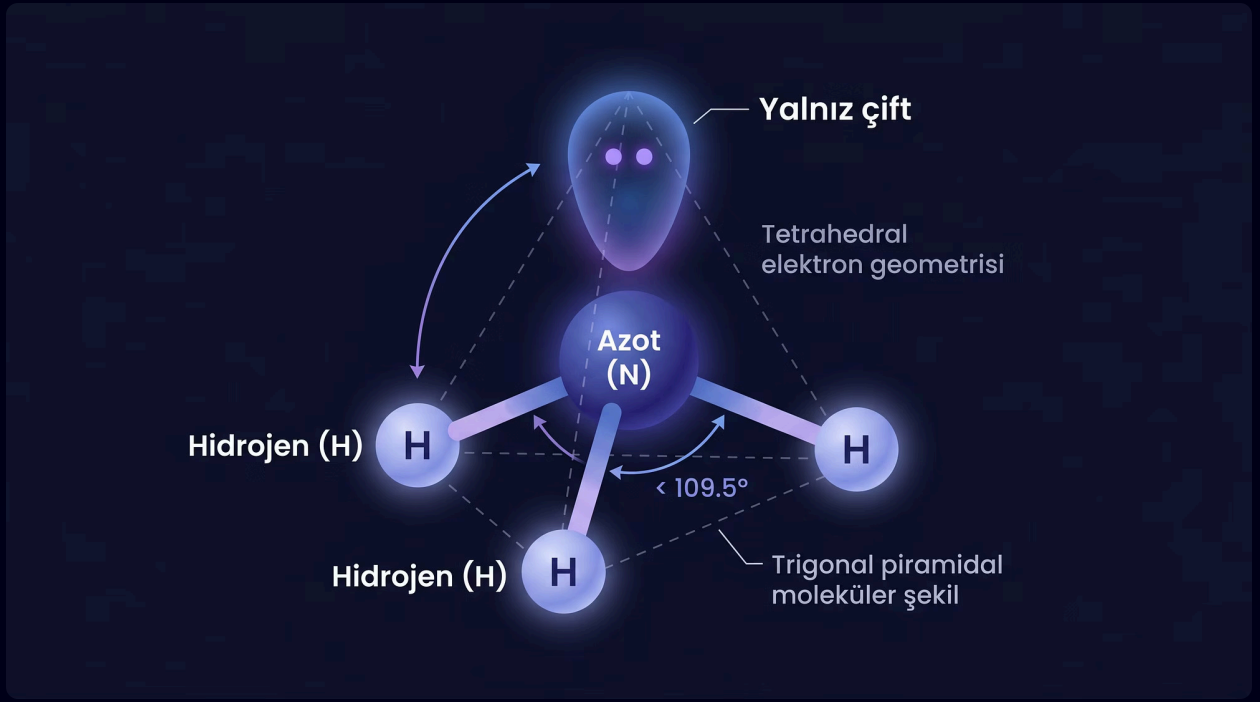
SN = 3 + 1 = **4**
sp3 hibridizasyonu
Tetrahedral elektron geometrisi

BF3

SN = 3 + 0 = **3**
sp2 hibridizasyonu
Düzlem üçgen geometrisi

Bu basit kural, bir molekülün şeklini tahmin etmemizi sağlar.

NH3: Elektron Düzenlemesi



Azot atomu beş değerlik elektronuna sahiptir; üç H atomuyla bağ kurarak sekizli konfigürasyonu tamamlar.

01

4 Elektron Bölgesi

Merkezi azot etrafında: 3 bağ çifti + 1 yalnız çift tanzim edilmiştir.

02

Tetrahedral Düzenleme

Dört elektron bölgesi tetrahedral düzenleme oluşturur.

03

Üçgen Piramit

Yalnız çift sayılmadığı için molekül **üçgen piramit** olarak gözlemlenir.

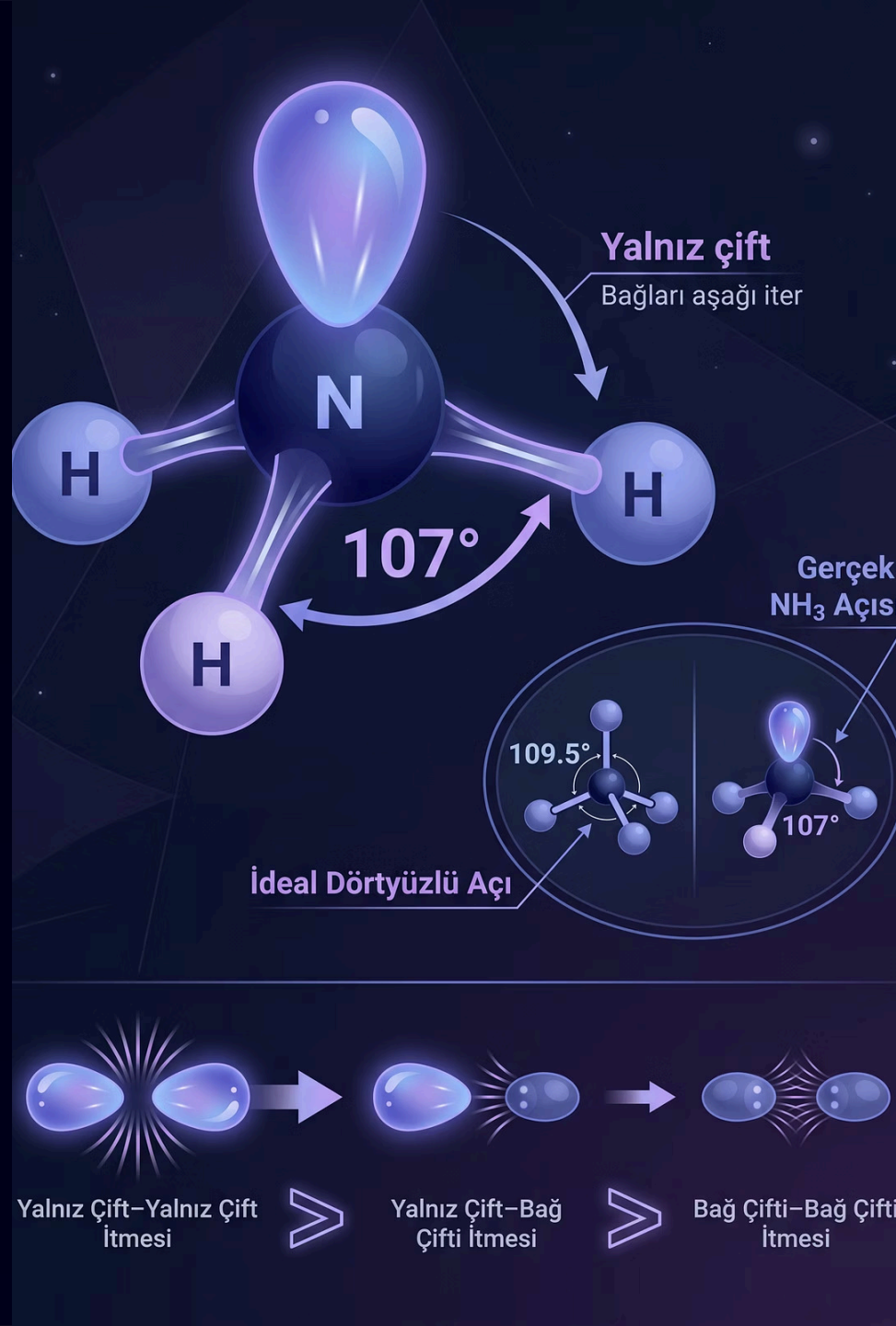
NH3: Bağ Açısı ve İtme Hiyerarşisi

Mükemmel tetrahedral açı 109.5° iken NH3'te H-N-H açısı yaklaşık **107°** olarak ayarlanmıştır.

Bu sapma, elektron çiftleri arasındaki itme gücü hiyerarşisinden kaynaklanır:

1. **Yalnız–Yalnız**
   En güçlü itme
2. **Yalnız–Bağ**
   Orta düzey itme
3. **Bağ–Bağ**
   En zayıf itme

Yalnız çift, bağ çiftlerine kıyasla daha fazla itme uygular ve bağ açıları ideal değerden aşağı çekilir.



NH3: sp3 Hibridizasyonu

Azot atomunda bir 2s ve üç 2p orbitali karışarak dört eşdeğer sp3 hibrit orbital oluşturulmuştur.

Üç sp3 Hibrit Orbital

H atomlarının 1s orbitalleriyle örtüşerek üç N-H sigma bağı oluşturur.

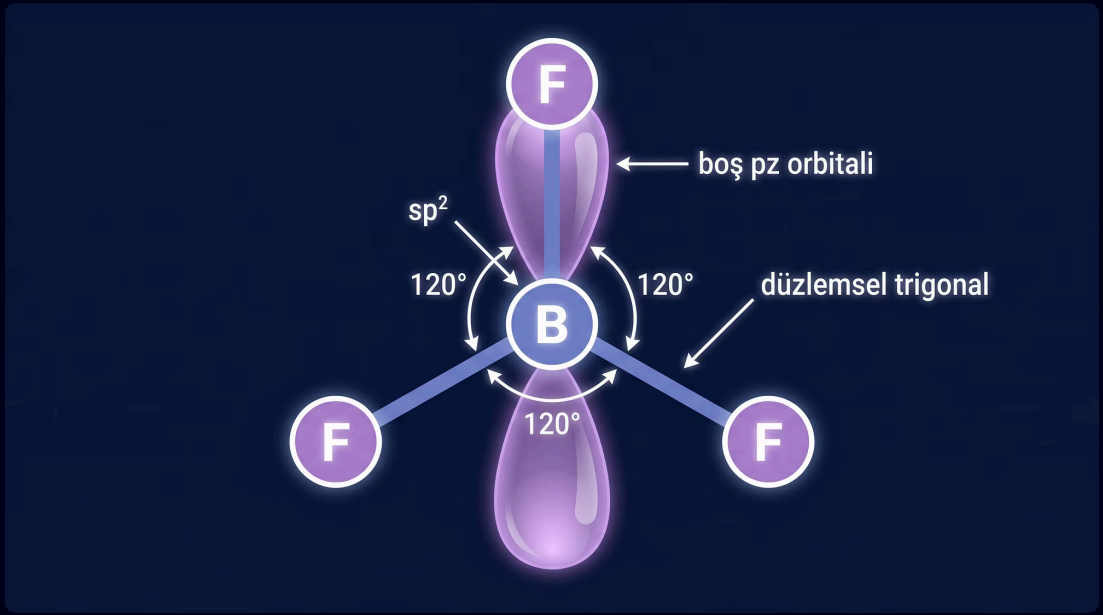
Dördüncü sp3 Orbital

Yalnız elektron çiftini barındırır.

Piramit Geometrisi

Yalnız çift daha fazla alan kaplar; piramit geometrisi bu nedenle oluşur.

BF3: sp2 Hibridizasyonu ve Düzlem Üçgen Geometri



Bor atomu üç değerlik elektronuna sahiptir; hiçbir yalnız çift bulunmaz.

01

sp2 Hibrit Orbitaller

Bir 2s ve iki 2p orbitali karışarak üç eşdeğer sp2 hibrit orbital oluşturulmuştur.

02

120° Açı

Bu üç orbital aynı düzlemdedir; aralarındaki açı tam **120°**.

03

pz Orbitali

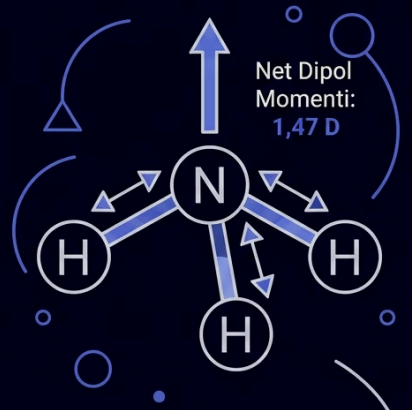
Hibridizasyona katılmayan pz orbitali bu düzleme dik kalır.

BF3'te elektron çifti geometrisi ile moleküler geometri özdeştir.

NH3 ve BF3: Polarite Karşılaştırması

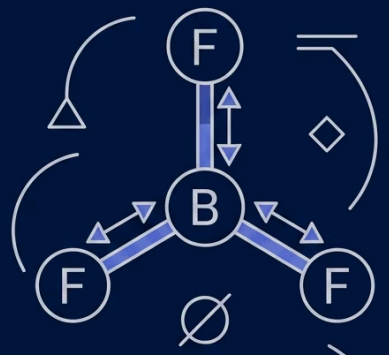
Moleküllerin geometrisi, elektriksel özelliklerini de belirler.

POLAR MOLEKÜL (NH_3)



Piramidal geometri. Bağ dipolleri birbirini iptal etmez. Net dipol momenti 1,47 D.

APOLAR MOLEKÜL (BF_3)



Net Dipol Momenti: 0 D

Düzlem üçgen geometri. Üç bağ dipolü mükemmel şekilde birbirini iptal eder.

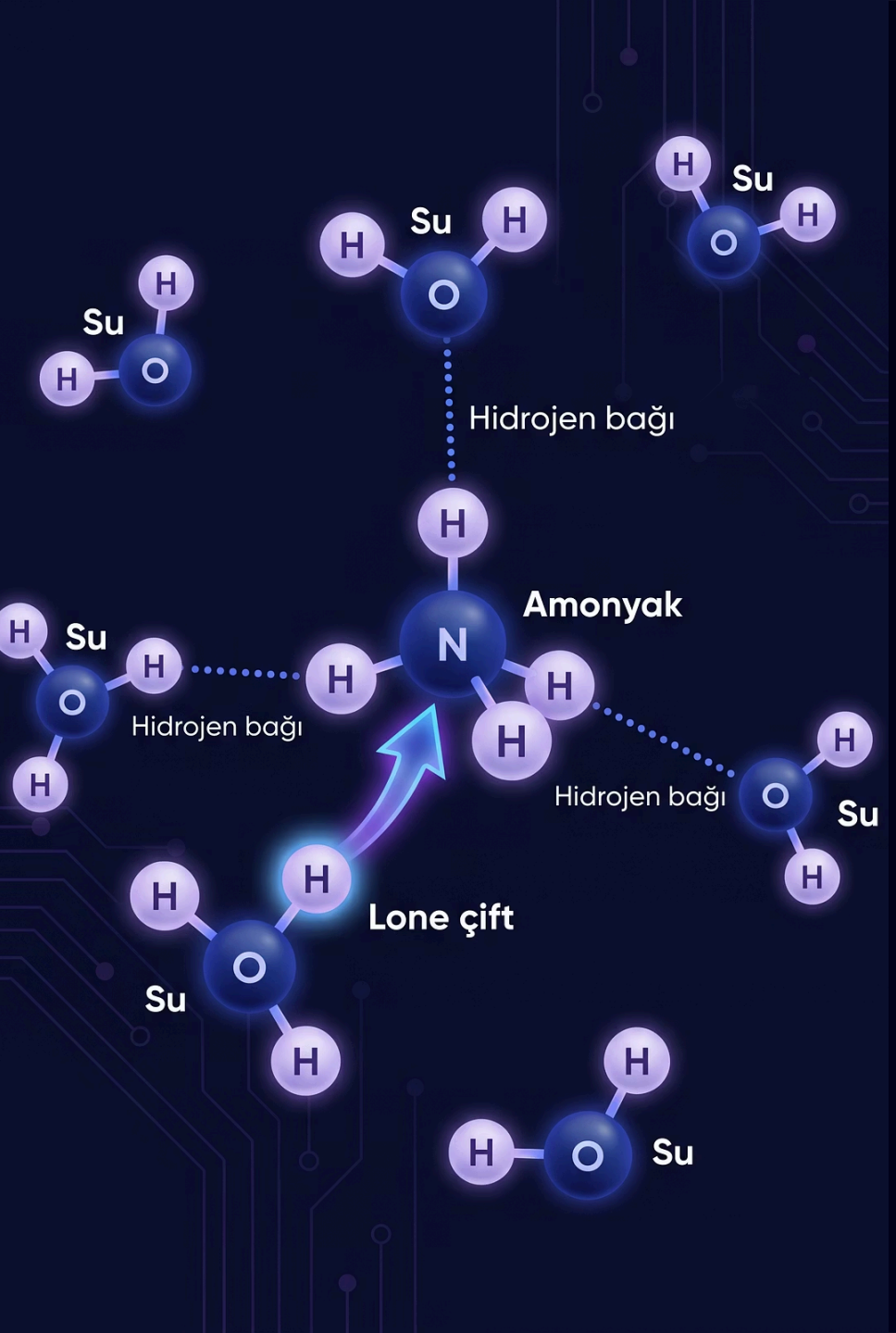
NH3 — Polar

Piramit geometri nedeniyle bağ dipolleri birbirini iptal etmez. **Net dipol momenti ≈ 1.47 D**

BF3 — Apolar

Düzlem üçgen geometri nedeniyle üç bağ dipolü birbirini tam olarak iptal eder. **Net dipol momenti = 0**

Her iki molekülde de B-F ve N-H bağları polardır; farkı yaratan geometridir.



Polarite → İşlevsellik

Geometri ve polarite, moleküllerin kimyasal özelliklerini doğrudan belirler.

NH3 — Lewis Bazı

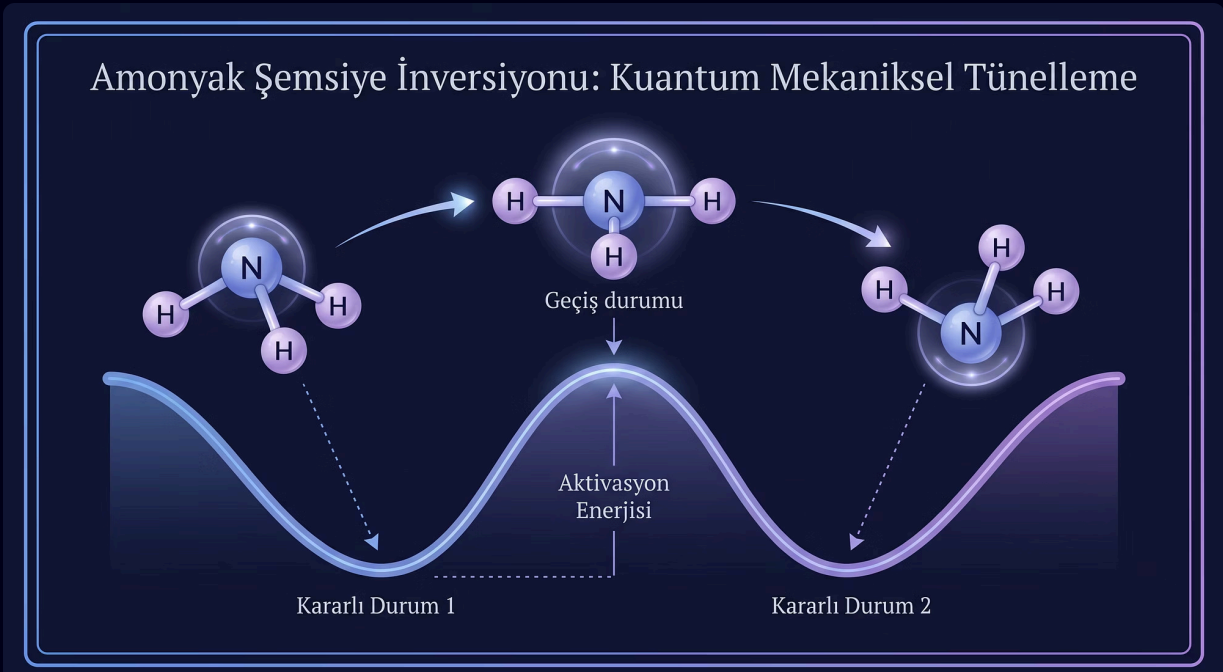
Polar yapısı sayesinde suda çözünür; yalnız çifti aracılığıyla **Lewis bazı** olarak görev yapar.

BF3 — Lewis Asidi

Apolar yapısıyla farklı çözücülerde çözünür; boş pz orbitaliyle **Lewis asidi** olarak davranır.

Piramit geometri → polar yapı → suda çözünürlük → baz özelliği zinciri, koordineli bir işlevsel entegrasyonu yansıtır.

Piramit İnversiyonu: Şemsiye Hareketi



NH3'ün dikkat çekici bir özelliği: azot atomu, hidrojen düzleminden diğer tarafa geçebilir — molekül sanki bir şemsiye gibi ters döner.

İnversiyon Hızı

Oda sıcaklığında saniyede yaklaşık **2×10^{11}** kez gerçekleşir.

Geçiş Durumu

Süreç sırasında molekül, geçici olarak düzlem üçgen bir geçiş durumundan geçer.

Potansiyel Enerji Eğrisi

Çift çukurlu yapı: iki kararlı piramit konfigürasyonu arasında bir enerji bariyeri.

İnversiyonun Üç Koşulu

Bu hızlı inversiyon, birbirini tamamlayan üç koşulun eşzamanlı sağlanmasıyla mümkün kılınmıştır:

Düşük Enerji Bariyeri

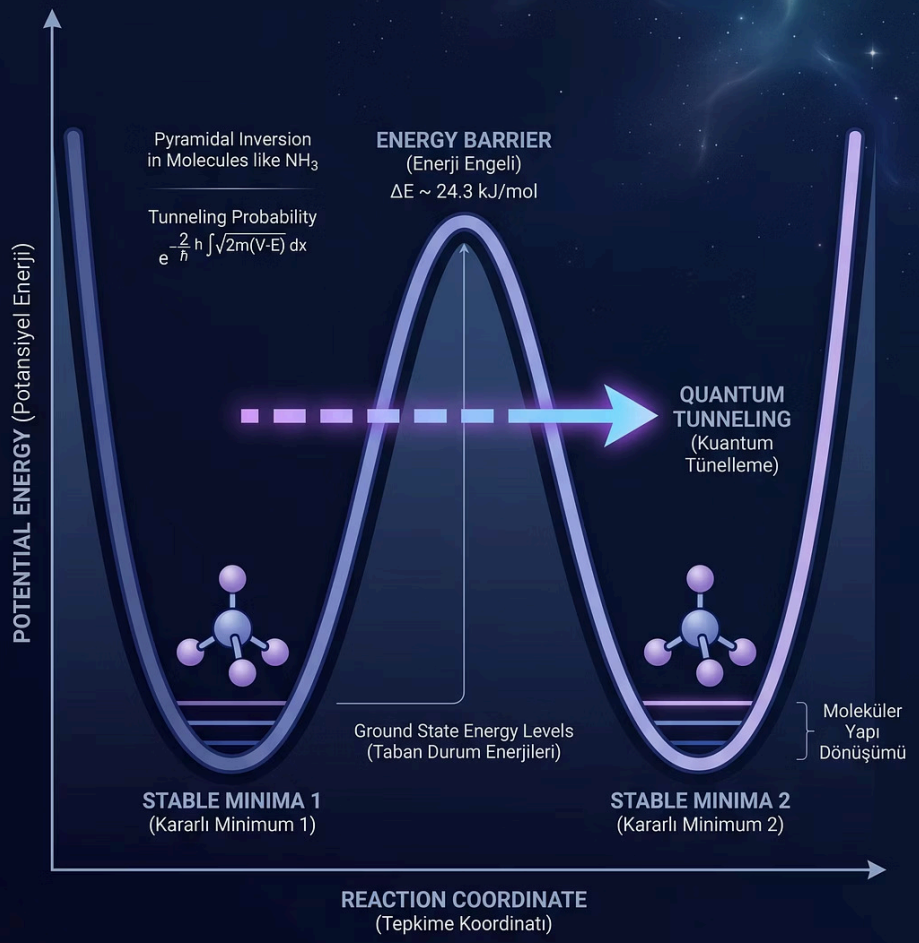
NH3 için inversiyon bariyeri ≈ **24.2 kJ/mol** olarak ayarlanmıştır.

Dar Bariyer Genişliği

İki piramit konfigürasyonu arasındaki geometrik mesafe küçük tutulmuştur.

Kuantum Tünelleme

Hidrojenin düşük kütlesi tünellemeyi mümkün kılar; inversiyon hızını yaklaşık **80 kat** artırır.



İnversiyon Bariyerinin Hassas Değeri

24.2 kJ/mol değeri işlevsel bir aralığa karşılık gelir.

Çok Yüksek Bariyer

Molekül dinamik özelliğini yitirirdi.

Çok Düşük Bariyer

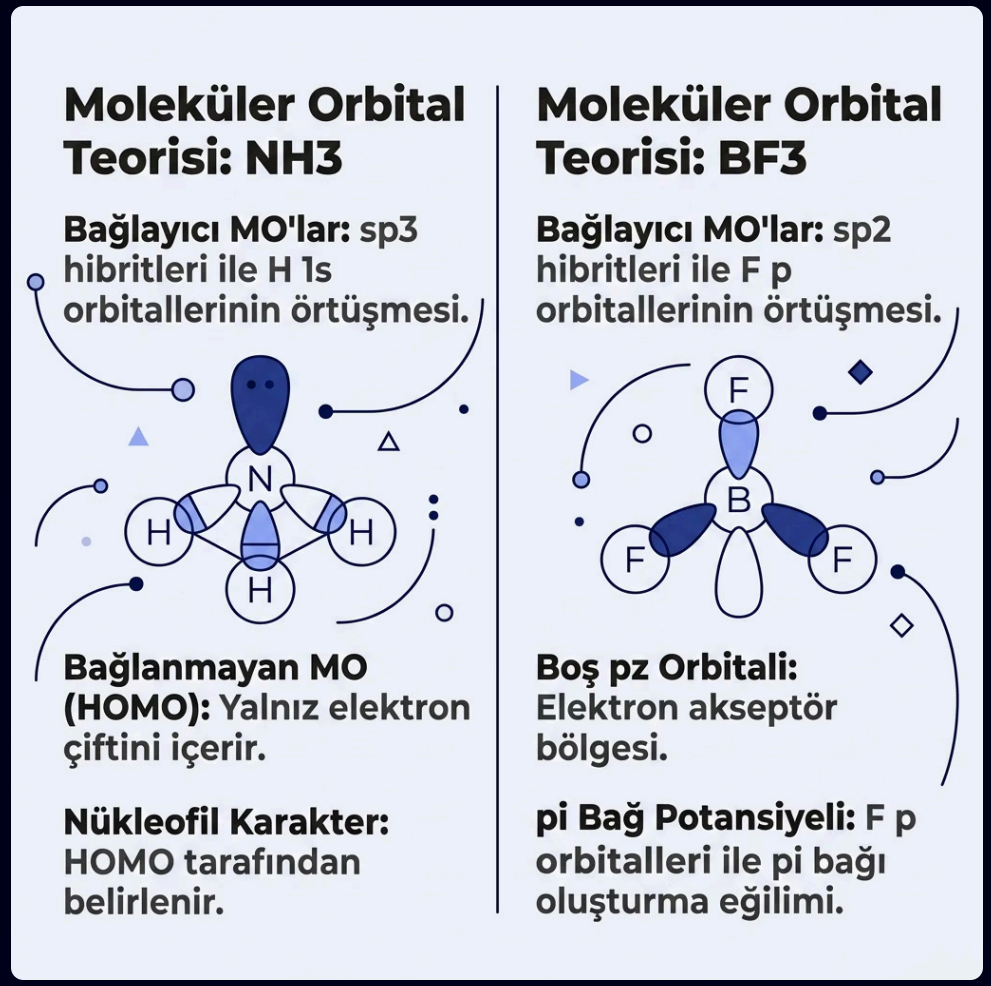
Molekül kararsız olurdu.

Optimal Değer

Kuantum tünellemenin gerçekleşebilmesi için üç koşul eşzamanlı sağlanmak zorundadır.

Bu üç koşulun rastlantısal olarak bir araya gelme olasılığı matematiksel açıdan son derece düşüktür.

Moleküler Orbital Perspektifi



Moleküler orbital teorisine göre elektronlar, tüm moleküle yayılmış orbitallerde bulunur.

NH3 — HOMO

Dört sp3 hibrit orbitalden üçü H atomlarıyla bağlayıcı moleküler orbitaller oluşturur; biri yalnız çift için bağlayıcı olmayan orbital olarak kalır. En yüksek dolu moleküler orbital (HOMO) bu yalnız çift orbitalidir ve NH3'ün **nükleofil özelliğini** belirler.

BF3 — Boş pz Orbitali

Üç sp2 hibrit orbital tamamen bağlayıcı orbitallerde kullanılır; boş pz orbitali flor p orbitalleriyle **pi bağı oluşturma potansiyeline** sahiptir.

Matematiksel Düzenin Gizemi

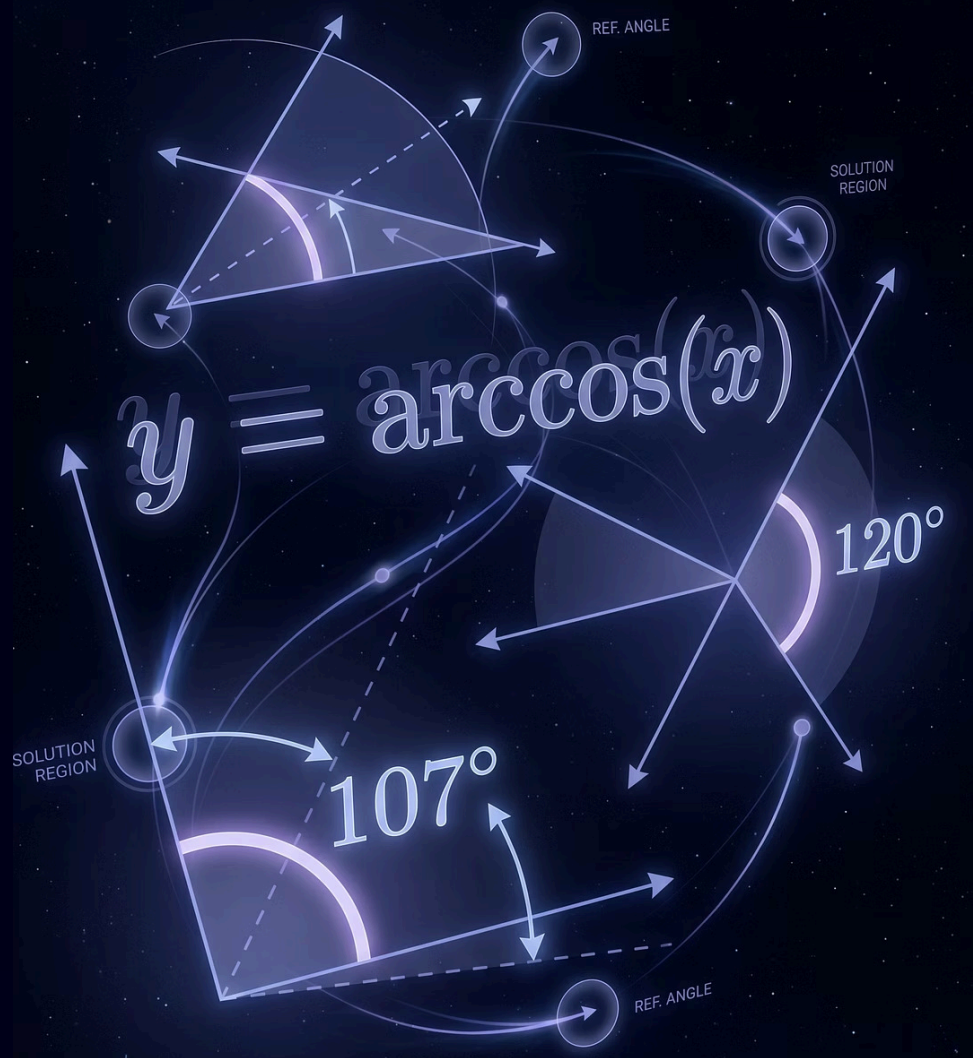
NH3'te H-N-H açısı tam 107°, BF3'te F-B-F açısı tam 120°; tetrahedral referans açısı ise **arccos(−1/3) ≈ 109.47°** şeklinde karmaşık bir matematiksel ifadeyle hesaplanır.

Hibridizasyon Katsayıları

Basit oranlar olarak belirlenmiştir: sp3 için **1/2** ve **√3**, sp2 için **1/√3** ve **√2**.

Derin Soru

Atomlar matematik bilmez; peki bu hassas oranları ve açıları kim belirledi?

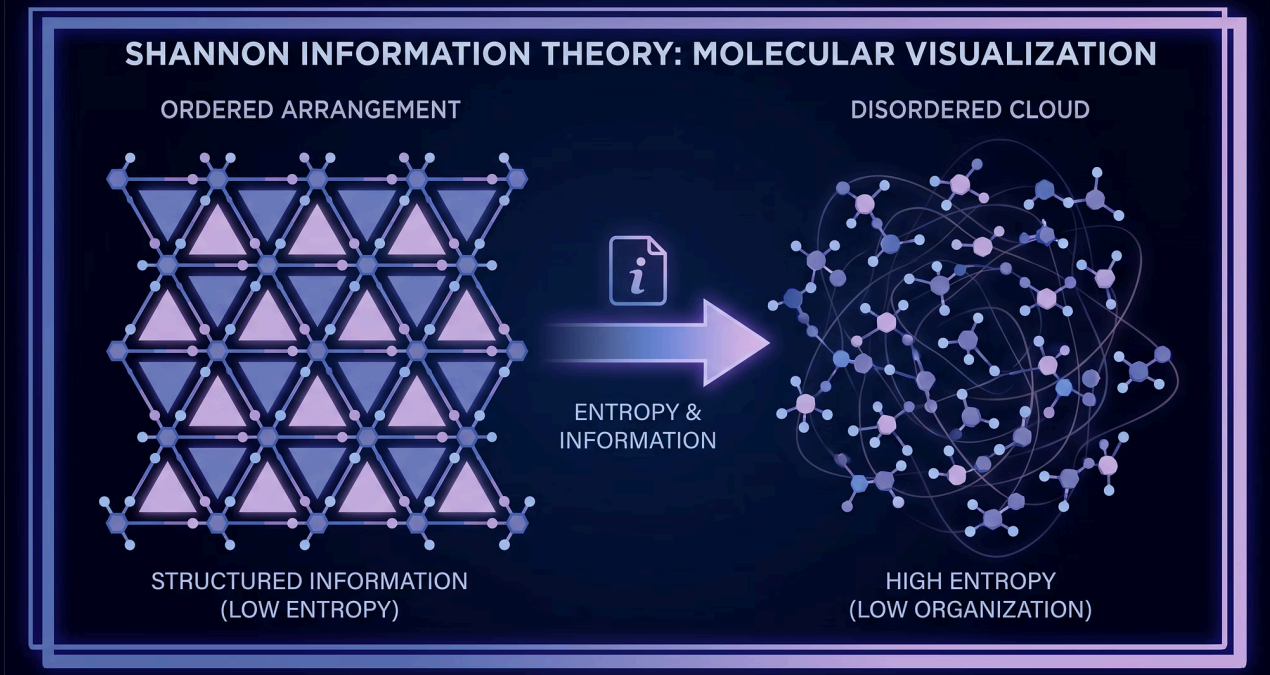


Bilgi İçeriği Problemi

NH3 ve BF3'ün spesifik geometrileri, düşük konfigürasyonel entropi anlamına gelir.

Shannon bilgi teorisi çerçevesinde, sistematik düzen yüksek bilgi içeriğine karşılık gelir:

$$I = -\sum p_i \log_2 p_i$$

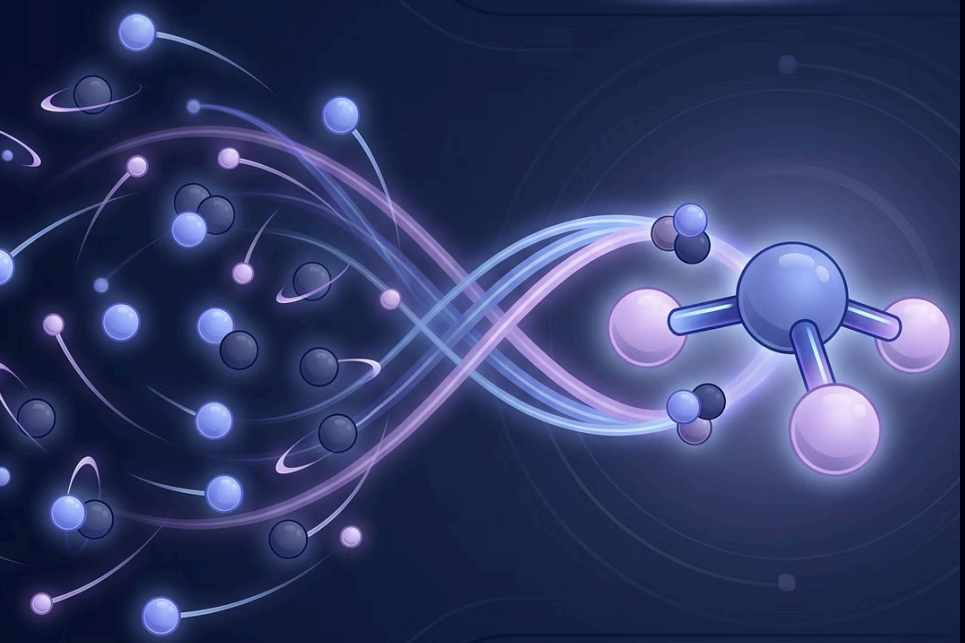


Yüksek Düzen = Yüksek Bilgi

Moleküler sistemlerdeki yüksek düzen, yüksek bilgi içeriğine işaret eder.

Kuantum Mekaniğinin Sınırı

Kuantum mekaniği yasaları bu düzeni *betimler*, ancak düzenin *kaynağını* açıklamaz.



Hammadde ve Sanat Eseri

Protonlar, nötronlar ve elektronlar hammaddedir. Ancak bu hammaddeden oluşturulan NH3 molekülü, parçalarının basit toplamından fazladır.

Parçalarda Olmayan Özellikler

Polarite, baz özelliği, piramit inversiyonu — bunların hiçbiri tek başına bir elektron veya protonda bulunmaz.

Ortaya Çıkan Özellikler

Parçalar özel bir düzenle bir araya geldiğinde, parçalarda olmayan özellikler ortaya çıkar.

Temel Soru

Bu geçiş — hammaddeden işlevsel bütüne — nereden ve nasıl gerçekleşiyor?

Çok Katmanlı Organizasyon

Moleküler sistemler dört koordineli katmanda örgütlenmiştir:

1

Kuantum Seviyesi

Elektronların dalga fonksiyonları ve enerji seviyeleri

2

Atomik Seviye

Orbitallerin hibridizasyonu ve elektron dağılımı

3

Moleküler Seviye

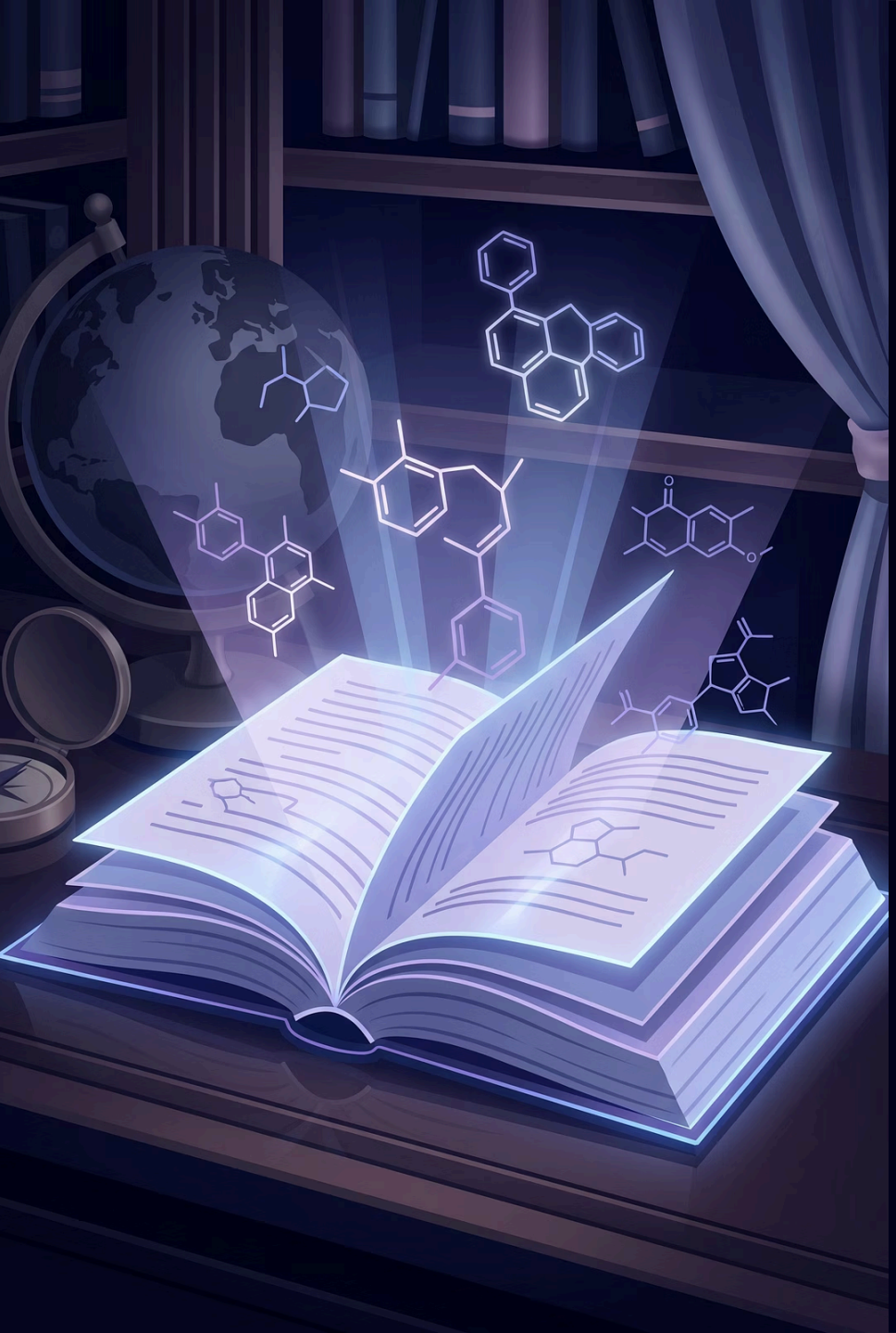
Bağların oluşumu ve geometrik düzenlemeler

4

Makroskobik Seviye

Kimyasal özellikler ve reaktivite

Her katmanda, bir öncekinde bulunmayan yeni özellikler sistematik biçimde tezahür eder.



Dersin Özeti: Deliller Önümüzde

Bu derste işlenen her kavram, birbiriyle koordineli bir düzene işaret ediyor:

Kesintisiz Zincir

Sterik sayı → hibridizasyon → geometri → polarite → işlevsellik zinciri kesintisiz işliyor.

Rastlantıyla Açıklanamaz

Bağ açılarındaki derece hassasiyeti, hibridizasyon katsayılarındaki matematiksel düzenlilik ve inversiyon bariyerinin optimize edilmiş değeri rastlantıyla açıklanamaz.

Farklı Bir Boyut

Bilimsel metodoloji "ne" ve "nasıl" sorularına cevap verir; "neden bu hassas düzen var" sorusu ise farklı bir boyut gerektirir.

> Deliller önünüzde — yorumu aklınıza ve vicdanınıza bırakıyorum.